

# Ein optimaler Eigenwertalgorithmus für hermitesche Matrizenpaare

Falk, Sigurd

Veröffentlicht in:  
Abhandlungen der Braunschweigischen  
Wissenschaftlichen Gesellschaft Band 52, 2002,  
S.65-91



J. Cramer Verlag, Braunschweig

# Ein optimaler Eigenwertalgorithmus für hermitesche Matrizenpaare

von **Sigurd Falk**, Braunschweig\*

(Eingegangen am 13.12.2002)

Vorgelegt von Helmut Braß

## 1. Aufgabenstellung. Was will der Anwender?

Vorgelegt ist die Matrix

$$\mathbf{F}(\lambda) = \mathbf{A} - \lambda \mathbf{B} \quad (1.1)$$

der Ordnung  $n$  mit dem hermiteschen (im Reellen symmetrischen) Paar

$$\mathbf{A}^* = \mathbf{A}; \quad \mathbf{B}^* = \mathbf{B} \text{ pos. def} \quad (1.2)$$

Die Eigenwerte als Lösungen der charakteristischen Gleichung

$$\det \mathbf{F}(\lambda) = 0 \quad (1.3)$$

sind reell und seien der Größe nach geordnet

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n \quad (1.4)$$

wobei mehrfache Eigenwerte durchnummeriert werden.

In den Anwendungen sind aus dem Spektrum (1.4) nur wenige, oft nur ein einziger Eigenwert von Interesse. Dies hat seinen Grund darin, daß bei der Modellbildung einer technischen Konstruktion oder auch bei der Finitisierung einer gewöhnlichen oder auch partiellen linearen Differentialgleichung die Ordnungszahl  $n$  sehr groß gewählt werden muß, um das reale Objekt möglichst gut abzubilden;  $n \geq 10\,000$  ist dabei keine Seltenheit.

Die zur Zeit den Softwaremarkt beherrschenden sogenannten "Eigenlöser" sind für den Sonderfall  $\mathbf{B} = \mathbf{I}_n$  die Zerlegungsverfahren LR (RUTISHAUER) und QR (FRANCIS), beschrieben in [13], [15], [16], [19], [21] sowie das JACOBISCHE Rotationsverfahren [24, S. 130]. Für das allgemeine Eigenwertproblem mit  $\mathbf{B} \neq \mathbf{I}_n$  existieren die Algorithmen QZ (STEWART und MOLER) sowie das Verfahren von FALK und LANGEMEYER für hermitesche Paare, siehe dazu [4] und [11]. Keines dieser Verfahren erlaubt die gezielte Berechnung eines oder weniger Eigenwerte, Parallelrechnung ist nur bedingt möglich, und über die erreichte Genauigkeit wird keine Auskunft erteilt; es sei denn, der Algorithmus endet mit dem Vermerk NAN (not a number) ohne Ergebnis, wie dies besonders bei hoher Ordnungszahl  $n$  und vollbesetzter Matrix  $\mathbf{B}$  zu beobachten ist.

---

\* Prof. Dr.-Ing. Sigurd Falk · Wendentorwall 15 A · D-38100 Braunschweig

In der vorliegenden Arbeit wird daher ein mit minimalem Aufwand absolut sicher arbeitender, dazu anwenderfreundlicher Algorithmus vorgestellt, der die folgenden drei Forderungen erfüllt:

1. Jeder Eigenwert wird unabhängig von den übrigen berechnet. Dies eröffnet die Möglichkeit zur **Parallelrechnung**.
2. Jeder Schritt ist ein erster Schritt. Der Algorithmus ist daher **selbstkorrigierend**.
3. Es besteht eine begleitende iterative **Einschließung** in jedem Stadium der Rechnung.

Als theoretische Grundlagen dienen das Trägheitsgesetz von SYLVESTER und der auf dem Minimum-Maximum-Prinzip von COURANT und HILBERT beruhende Trennungssatz. Anhand einiger Beispiele wird die Wirksamkeit des Verfahrens vorgeführt.

## 2. Das SCHUR-Komplement

Wir unterteilen die Matrix (1.1) auf folgende Weise

$$\mathbf{F}(\lambda) = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{jj}(\lambda) & \mathbf{f}_{jk}(\lambda) \\ \mathbf{f}_{jk}^*(\lambda) & f_{kk}(\lambda) \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

und multiplizieren sie mit der Matrix

$$\mathbf{L}(\lambda) = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{n-1} & \mathbf{o} \\ -\mathbf{f}_{jk}^*(\lambda)\mathbf{F}_{jj}^{-1} & 1 \end{bmatrix}, \quad \det \mathbf{L}(\lambda) = 1 \quad (2.2)$$

von links, das gibt die transformierte Matrix

$$\tilde{\mathbf{F}}(\lambda) = \mathbf{L}(\lambda)\mathbf{F}(\lambda) = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{jj}(\lambda) & \mathbf{f}_{jk}(\lambda) \\ \mathbf{o}^T & s_{kk}(\lambda) \end{bmatrix}, \quad (2.3)$$

mit dem reellwertigen SCHUR-Komplement

$$s_{kk}(\lambda) = f_{kk}(\lambda) - \mathbf{f}_{jk}^*(\lambda)\mathbf{F}_{jj}^{-1}(\lambda)\mathbf{f}_{jk}(\lambda). \quad (2.4)$$

Nach dem Entwicklungssatz für Determinanten folgt aus (2.3) zunächst

$$\det\{\mathbf{L}(\lambda)\mathbf{F}(\lambda)\} = \det \mathbf{F}(\lambda) = \det \mathbf{F}_{jj}(\lambda)s_{kk}(\lambda), \quad (2.5)$$

somit

$$s_{kk}(\lambda) = \frac{\det \mathbf{F}(\lambda)}{\det \mathbf{F}_{jj}(\lambda)}, \quad (2.6)$$

und es zeigt sich, daß die modifizierte Gleichung

$$\boxed{s_{kk}(\lambda) = 0} \quad (2.7)$$

numerisch sehr viel geeigneter ist als die Definitionsgleichung (1.3). Die Nullstellen der rational gebrochenen Funktion (2.6) sind die gesuchten Eigenwerte (1.4), und die Eigenwerte des Hauptminors  $\mathbf{F}_{jj}(\lambda)$  sind die Polstellen

$$\sigma_1 \leq \sigma_2 \leq \dots \leq \sigma_{n-1}. \quad (2.8)$$

Werden auch hier mehrfache Eigenwerte durchnumeriert, so gilt nach dem **Trennungssatz** [24, S. 59]

$$\boxed{\lambda_1 \leq \sigma_1 \leq \lambda_2 \leq \sigma_2 \leq \dots \leq \lambda_{n-1} \leq \sigma_{n-1} \leq \lambda_n}. \quad (2.9)$$

Es sei nun  $\lambda_\nu$  ein Eigenwert der Vielfachheit  $v_\nu$ , dann besitzt jeder Hauptminor  $\mathbf{F}_{jj}(\lambda)$  der Ordnung  $n-1$  seinerseits den Eigenwert  $\lambda_\nu$  mit der Vielfachheit  $v_\nu - 1$ ; es wird daher das SCHUR-Komplement mit zwei in diesem Zusammenhang unwichtigen Teilpolynomen  $r(\lambda)$  und  $t(\lambda)$

$$s_{kk}(\lambda) = \frac{\det \mathbf{F}(\lambda)}{\det \mathbf{F}_{jj}(\lambda)} = \frac{r(\lambda) \cdot (\lambda_\nu - \lambda)^{v_\nu}}{t(\lambda) \cdot (\lambda_\nu - \lambda)^{v_\nu - 1}} = \frac{r(\lambda)}{t(\lambda)} \cdot (\lambda_\nu - \lambda). \quad (2.10)$$

Das SCHUR-Komplement besitzt daher nur **einfache** Nullstellen. Dazu ein einfaches Beispiel. Das Paar

$$\mathbf{A} = \left[ \begin{array}{ccccc|c} -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \end{array} \right]; \quad \mathbf{B} = \mathbf{I}_5 \quad (2.11)$$

besitzt die Eigenwerte

$$\lambda_1 = -2; \quad \lambda_2 = \lambda_3 = -1; \quad \lambda_4 = \lambda_5 = 1. \quad (2.12)$$

Die Eigenwerte der Matrix  $\mathbf{F}_{jj}(\lambda)$  sind bei der vorgenommenen Partitionierung in (2.11)

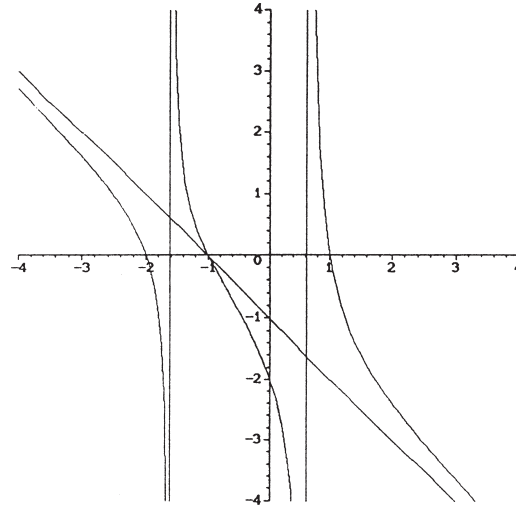
$$\sigma_1 = -0,5 - \sqrt{1,25} \approx -1,618; \quad \sigma_2 = -1; \quad \sigma_3 = -0,5 + \sqrt{1,25} \approx 0,618; \quad \sigma_4 = 1, \quad (2.13)$$

und damit gilt der Trennungssatz (2.9), wie man leicht nachprüft.

Man beachte aber, daß  $\sigma_2 = -1$  ebenso wie  $\sigma_4 = 1$  zufolge der Kürzungseigenschaft (2.10) keinen Pol hervorruft!

Ganz allgemein gilt nun für die Funktion  $s_{kk}(\lambda)$  folgendes:

1. Sie ist eindeutig, streng monoton abnehmend und reellwertig auch dann, wenn das Paar  $\mathbf{A}; \mathbf{B}$  komplex hermitesch ist.
2. Sie besitzt zwischen je zwei Polen genau einen Wendepunkt. Dieser fällt für einen **mehrfachen** Eigenwert mit demselben zusammen.

Abbildung 1: Das SCHUR-Komplement  $s_{kk}(\lambda)$  zum Matrizenpaar (2.11)

3. Sie besitzt eine geradlinige, von links nach rechts fallende Asymptote. Falls  $\mathbf{B}$  diagonal (insbesondere  $\mathbf{B} = \mathbf{I}_n$ ) ist, lautet deren Gleichung

$$f_{kk}(\lambda) = a_{kk} - \lambda b_{kk}; \quad b_{kk} > 0. \quad (2.14)$$

Für das Paar (2.11) ist somit  $f_{kk}(\lambda) = -1 - \lambda$ , und der zweifache Eigenwert -1 ist ein Wendepunkt, siehe dazu Abb. 1.

Schließlich zeigen wir noch, daß das SCHUR-Komplement gegenüber einer regulären Ähnlichkeitstransformation des Hauptminors  $\mathbf{F}_{jj}(\lambda)$  invariant ist:

$$\mathbf{F}(\lambda) = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{jj}(\lambda) & \mathbf{f}_{jk}(\lambda) \\ \mathbf{f}_{jk}^*(\lambda) & f_{kk}(\lambda) \end{bmatrix}; \quad \tilde{\mathbf{F}}(\lambda) = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_j \mathbf{F}_{jj}(\lambda) \mathbf{R}_j & \mathbf{L}_j \mathbf{f}_{jk}(\lambda) \\ \mathbf{f}_{jk}^*(\lambda) \mathbf{R}_j & f_{kk}(\lambda) \end{bmatrix}. \quad (2.15)$$

Daraus folgt

$$\left. \begin{aligned} \tilde{s}_{kk}(\lambda) &= f_{kk}(\lambda) - \mathbf{f}_{jk}^*(\lambda) \mathbf{R}_j [\mathbf{L}_j \mathbf{F}_{jj}(\lambda) \mathbf{R}_j]^{-1} \mathbf{L}_j \mathbf{f}_{jk}(\lambda) \\ &= f_{kk}(\lambda) - \mathbf{f}_{jk}^*(\lambda) \underbrace{\mathbf{R}_j \mathbf{R}_j^{-1}} \mathbf{F}_{jj}^{-1}(\lambda) \underbrace{\mathbf{L}_j^{-1} \mathbf{L}_j}_{\mathbf{I}} \mathbf{f}_{jk}(\lambda), \end{aligned} \right\} \quad (2.16)$$

und weiter wegen  $\mathbf{R}_j \mathbf{R}_j^{-1} = \mathbf{I}_{n-1}$  und  $\mathbf{L}_j^{-1} \mathbf{L}_j = \mathbf{I}_{n-1}$

$$\tilde{s}_{kk}(\lambda) = f_{kk}(\lambda) - \mathbf{f}_{jk}^*(\lambda) \mathbf{F}_{jj}^{-1}(\lambda) \mathbf{f}_{jk}(\lambda), \quad (2.17)$$

somit gilt

$$\tilde{s}_{kk}(\lambda) = s_{kk}(\lambda), \quad (2.18)$$

was zu zeigen war.

Anmerkung: nur aus Gründen der einfachen Darstellbarkeit haben wir bei der Partitionierung (2.1)  $k = n$  gewählt; alles Gesagte gilt natürlich sinngemäß auch für  $k \neq n$ . Es gibt somit  $n$  verschiedene SCHUR-Komplemente. Sie alle besitzen die gleichen Nullstellen (1.4), aber im allgemeinen unterschiedliche Polstellen (2.8).

### 3. Das Endpivot als Funktion des Parameters $\Lambda$

Die Funktion  $s_{kk}(\lambda)$  (2.4) bzw. (2.6) läßt sich für Ordnungszahlen  $n > 2$  nur punktweise berechnen. Zu diesem Zweck wird nach Wahl eines reellwertigen Schiftpunktes  $\Lambda$  die Matrix  $\mathbf{F}(\Lambda)$  explizit aufgestellt und mit Hilfe des Gaußschen Algorithmus pivotisiert, wobei die Pivots nur aus der Hauptdiagonale gewählt werden dürfen! Zufolge der Invarianzeigenschaft (2.18) mit  $\mathbf{R}_j = \mathbf{I}_{n-1}$  (keine Spaltenkombination) und der Gaußschen Transformationsmatrix  $\mathbf{L}_j$  der Ordnung  $n - 1$  mit  $\det \mathbf{L}_j = 1$  wird

$$\det \mathbf{F}_{jj}(\Lambda) = p_{11}(\Lambda)p_{22}(\Lambda) \cdots p_{n-1,n-1}(\Lambda), \quad (3.1)$$

$$\det \mathbf{F}(\Lambda) = p_{11}(\Lambda)p_{22}(\Lambda) \cdots p_{n-1,n-1}(\Lambda) \cdot p_{nn}(\Lambda), \quad (3.2)$$

und nun folgt aus der Darstellung (2.6)

$$\tilde{s}_{kk}(\Lambda) = \frac{\det \tilde{\mathbf{F}}(\Lambda)}{\det \tilde{\mathbf{F}}_{jj}(\Lambda)} = \frac{p_{11}(\Lambda)p_{22}(\Lambda) \cdots p_{n-1,n-1}(\Lambda) \cdot p_{nn}(\Lambda)}{p_{11}(\Lambda)p_{22}(\Lambda) \cdots p_{n-1,n-1}(\Lambda)}, \quad (3.3)$$

so daß zufolge (2.18) verbleibt

$$\boxed{s_{kk}(\Lambda) = p_{kk}(\Lambda)}. \quad (3.4)$$

Mit Hilfe des Endpivots läßt sich daher das SCHUR-Komplement punktweise berechnen und ausdrucken, siehe dazu die Abbn. 1 und 2.

### 4. Iterative Berechnung eines einfachen Eigenwertes

Neben der Trennungseigenschaft (2.9) besteht eine zweite für das folgende grundlegende Besonderheit hermitescher Paare, nämlich das **Trägheitsgesetz von SYLVESTER**, siehe dazu [13, S. 40] oder [23, S. 228]. Es besagt: unter den  $n$  Pivots der Matrix  $\mathbf{F}(\Lambda)$  seien  $\mu$  negativ, dann gilt

$$\boxed{\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_\mu < \Lambda}. \quad (4.1)$$

In Worten: links vom Schift  $\Lambda$  liegen die  $\mu$  ersten (kleinsten) Eigenwerte des hermiteschen Paares  $\mathbf{A}$ ;  $\mathbf{B}$ . Die nichtnegative ganze Zahl  $\mu$  heißt daher die Kennziffer des Paares  $\mathbf{A}$ ;  $\mathbf{B}$  zum Schiftpunkt  $\Lambda$ .

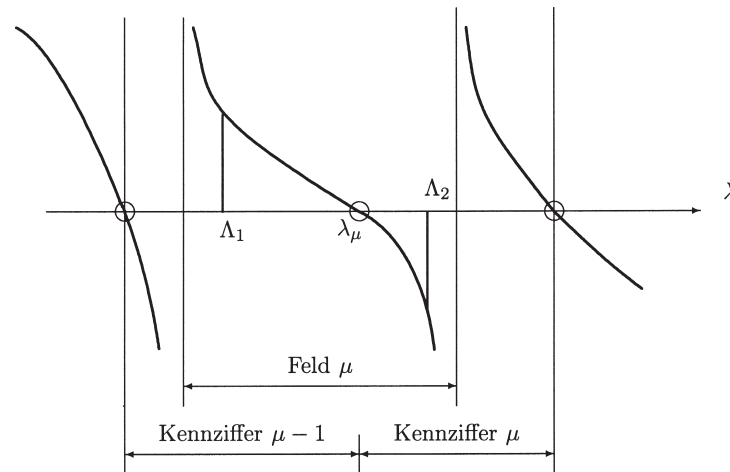


Abbildung 2: Zur Definition des Feldes

Wir interessieren uns nun für den Zusammenhang zwischen Endpivot und Kennziffer und definieren dazu als **Feld** der Nummer  $\mu$  den Bereich zwischen den beiden Polen  $\sigma_{\mu-1}$  und  $\sigma_\mu$  nach Abb. 2. Ein Schift  $\Lambda$  sei gegeben, und die Frage lautet: in welchem Feld befindet er sich?

Mittels der Kennziffer  $\mu$  läßt sich dies leicht entscheiden; es gilt nämlich nach Abb. 2 die eindeutige **Zuordnung**

$$\text{Kennziffer } \mu : \begin{cases} \text{Endpivot negativ: } \Lambda \text{ im Feld } \mu - 1 \\ \text{Endpivot positiv: } \Lambda \text{ im Feld } \mu \end{cases} \quad (4.2)$$

Es seien nun zwei Schiftpunkte  $\Lambda_1$  und  $\Lambda_2 > \Lambda_1$  gegeben, die sich beide im gleichen Feld der Nummer  $\mu$  befinden, und es sei überdies  $p_{kk}(\Lambda_1)$  positiv und  $p_{kk}(\Lambda_2)$  negativ, dann besteht nach Abb. 2 die Einschließung

$$\Lambda_1 < \lambda_\mu < \Lambda_2, \quad (4.3)$$

und die Aufgabe besteht darin, diese im allgemeinen recht grobe Aussage zu verbessern.

## 5. Die verallgemeinerte Regula falsi (V R F)

Zu lösen ist die Gleichung

$$y = f(x) = 0 \quad (5.1)$$

Es wird eine Näherungsfunktion  $z = g(x)$  derart bestimmt, daß an  $p$  vorgegebenen Stellen  $x_1, x_2, \dots, x_p$  in der Nachbarschaft einer gesuchten Nullstelle  $\tilde{x}$  die Übereinstimmung gilt  $f(x_j) = z(x_j)$ , oder kurz

$$y_j = z_j; \quad j = 1, 2, \dots, p. \quad (5.2)$$

Die Nullstelle  $\hat{x}$  der Ersatzfunktion gilt dann als Näherung für  $\bar{x}$ . Als Ersatzfunktionen bieten sich (unter unendlich vielen Möglichkeiten, siehe dazu [6]) als die einfachsten die folgenden an:

2 Punkte (Regula falsi). Die Gerade

$$z + ax + b = 0. \quad (5.3)$$

3 Punkte. Die gleichseitige Hyperbel

$$(z - a)(x - b) + c = 0. \quad (5.4)$$

4 Punkte. Die ungleichseitige Hyperbel

$$(z - a)(z + bx + c) + d = 0. \quad (5.5)$$

Dabei werden die freien Konstanten a, b. bzw. a, b, c bzw. a, b, c, d so bestimmt, daß die p Gleichungen (5.2) erfüllt sind, und zwar geschieht diese Anpassung über die Differenzenquotienten

$$\Delta_j = \frac{y_j - y_1}{x_j - x_1}, \quad j = 2, 3, 4, \dots \quad (5.6)$$

Für die Regula falsi (5.3) gilt bekanntlich

$$\hat{x} = x_1 - \frac{y_1}{\Delta_2}, \quad (5.7)$$

und im allgemeinen Fall  $p > 2$  wird ganz analog

$$\hat{x} = x_1 - \frac{y_1}{w_p}, \quad (5.8)$$

wo  $w_p$  aus einem linearen Gleichungssystem der Ordnung p-1

$$\mathbf{A}_p \mathbf{w}_p = \mathbf{r}_p \quad (5.9)$$

mit

$$\mathbf{w}_p = \begin{bmatrix} w_2 \\ w_3 \\ \dots \\ w_p \end{bmatrix}, \quad \mathbf{r}_p = \begin{bmatrix} \Delta_2 \\ \Delta_3 \\ \dots \\ \Delta_p \end{bmatrix} \quad (5.10)$$

zu berechnen ist.

Die zu (5.4) und (5.5) gehörenden Matrizen  $\mathbf{A}_3$  und  $\mathbf{A}_4$  sind

$$\mathbf{A}_3 = \begin{bmatrix} y_2 & 1 \\ y_3 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_4 = \begin{bmatrix} y_2 & y_2 \Delta_2 & 1 \\ y_3 & y_3 \Delta_3 & 1 \\ y_4 & y_4 \Delta_4 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.11)$$

und für  $p = 5$  bis  $p = 8$  wird



$$\mathbf{A}_5 = \begin{bmatrix} y_2 & y_2\Delta_2 & y_2^2 & 1 \\ y_3 & y_3\Delta_3 & y_3^2 & 1 \\ y_4 & y_4\Delta_4 & y_4^2 & 1 \\ y_5 & y_5\Delta_5 & y_5^2 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_6 = \begin{bmatrix} y_2 & y_2\Delta_2 & y_2^2 & y_2^2\Delta_2 & 1 \\ y_3 & y_3\Delta_3 & y_3^2 & y_3^2\Delta_3 & 1 \\ y_4 & y_4\Delta_4 & y_4^2 & y_4^2\Delta_4 & 1 \\ y_5 & y_5\Delta_5 & y_5^2 & y_5^2\Delta_5 & 1 \\ y_6 & y_6\Delta_6 & y_6^2 & y_6^2\Delta_6 & 1 \end{bmatrix}, \quad (5.12)$$

$$\mathbf{A}_7 = \begin{bmatrix} y_2 & y_2\Delta_2 & y_2^2 & y_2^2\Delta_2 & y_2^3 & 1 \\ y_3 & y_3\Delta_3 & y_3^2 & y_3^2\Delta_3 & y_3^3 & 1 \\ y_4 & y_4\Delta_4 & y_4^2 & y_4^2\Delta_4 & y_4^3 & 1 \\ y_5 & y_5\Delta_5 & y_5^2 & y_5^2\Delta_5 & y_5^3 & 1 \\ y_6 & y_6\Delta_6 & y_6^2 & y_6^2\Delta_6 & y_6^3 & 1 \\ y_7 & y_7\Delta_7 & y_7^2 & y_7^2\Delta_7 & y_7^3 & 1 \end{bmatrix}, \quad (5.13)$$

$$\mathbf{A}_8 = \begin{bmatrix} y_2 & y_2\Delta_2 & y_2^2 & y_2^2\Delta_2 & y_2^3 & y_2^3\Delta_2 & 1 \\ y_3 & y_3\Delta_3 & y_3^2 & y_3^2\Delta_3 & y_3^3 & y_3^3\Delta_3 & 1 \\ y_4 & y_4\Delta_4 & y_4^2 & y_4^2\Delta_4 & y_4^3 & y_4^3\Delta_4 & 1 \\ y_5 & y_5\Delta_5 & y_5^2 & y_5^2\Delta_5 & y_5^3 & y_5^3\Delta_5 & 1 \\ y_6 & y_6\Delta_6 & y_6^2 & y_6^2\Delta_6 & y_6^3 & y_6^3\Delta_6 & 1 \\ y_7 & y_7\Delta_7 & y_7^2 & y_7^2\Delta_7 & y_7^3 & y_7^3\Delta_7 & 1 \\ y_8 & y_8\Delta_8 & y_8^2 & y_8^2\Delta_8 & y_8^3 & y_8^3\Delta_8 & 1 \end{bmatrix}. \quad (5.14)$$

Es ist wichtig zu bemerken, daß alle der Interpolation zugrundeliegenden Funktionen (die für die Rechnung selbst uninteressant sind) nur eine einzige Nullstelle, eben die Näherung (5.8) besitzen. Ferner halten wir fest, daß die Numerierung der Punktepaare  $(x_j; y_j)$  beliebig ist; doch empfiehlt es sich, die **betragskleinste** Ordinate mit  $y_1$  zu bezeichnen.

Im hier vorliegenden Fall des SCHUR-Komplementes schreiben wir anstelle von  $s_{kk}(\lambda)$  im folgenden  $y(x)$ , damit wir die Formeln (5.3) bis (5.14) direkt übernehmen können.

Nun zur Strategie. Es seien die Testwerte (Shifts)

$$x_1, x_2, \dots, x_p \quad (5.15)$$

vorgegeben, dann berechnet man aus den Matrizen  $\mathbf{F}(x_1)$  bis  $\mathbf{F}(x_p)$  die Funktionswerte (Endpivots)

$$y_1, y_2, \dots, y_p \quad (5.16)$$

und daraus die Differenzenquotienten (5.6)

$$\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_p, \quad (5.17)$$

womit die Matrix  $\mathbf{A}_p$  und nach einiger Rechnung (Gaußscher Algorithmus mit oder ohne Pivotsuche) auch der Näherungswert  $\hat{x}$  nach (5.8) festliegt. Anschließend wird der betragsgrößte der Werte  $y_j$  (5.16) herausgesucht und der zugehörige Wert  $x_j$  aus der Serie (5.15) entfernt. Dafür wird  $\hat{x}$  als  $x_1$  neu in die Serie eingeführt, die nun umnummeriert werden muß; sogenanntes **Austauschverfahren**. Mit der erneuerten Serie erfolgt der nächste Schritt, und dies wird solange fortgeführt, bis zwei aufeinanderfolgende Näherungswerte in den

ersten  $\rho$  Dezimalen übereinstimmen, wobei in praxi im allgemeinen schon  $\rho = 4$  oder 5 genügen wird.

Zu Konvergenz und Einschließung kommen wir in den Abschnitten 11 und 8.

## 6. Sondierung

Es sollen nun die Eigenwerte innerhalb eines vorgegebenen Bereiches der Länge

$$\ell = \widehat{\Lambda} - \underline{\Lambda} > 0 \quad (6.1)$$

berechnet werden. Zu diesem Zweck werden aus den Matrizen  $\mathbf{F}(\widehat{\Lambda})$  und  $\mathbf{F}(\underline{\Lambda})$  die Kennziffern ermittelt. Ihre Differenz sei  $m$ , dann liegen im Bereich (6.1) genau  $m$  Eigenwerte. Der Bereich wird nun unterteilt in  $\rho \cdot m$  Abschnitte gleicher Länge, wo  $\rho = 4$  oder auch größer sein sollte. Für jeden der  $\rho \cdot m$  Testschritte werden Kennziffer und Endpivot berechnet und damit nach (4.2) eindeutig in ein Feld bestimmter Nummer überwiesen. Es ist darauf zu achten, daß für alle  $\rho \cdot m$  Testwerte die gleiche Partitionierung gewählt wird. Bei der iterativen Berechnung eines einzelnen Eigenwertes darf dagegen der Index  $k$  von Feld zu Feld wechseln, doch besteht im allgemeinen kein Anlaß, von der Partitionierung (2.1) mit  $k = n$  abzuweichen.

Es sind nun zwei Fälle zu unterscheiden.

### a) Standard

In jedem Feld befinden sich  $p$  Endpivots, die nicht alle vom gleichen Vorzeichen sind, so daß die Startsituation von Abb. 3 vorliegt. Ist  $p$  zu groß (etwa  $p \geq 8$ ), so werden einer oder mehrere der betragsgrößten Endpivots von der Konkurrenz ausgeschlossen, jedoch so, daß mindestens zwei der verbleibenden Endpivots von verschiedenem Vorzeichen sind. Ist  $p$  dagegen zu klein (etwa  $p \leq 3$ ), so beginnt das im Abschnitt 5 beschriebene Austauschverfahren erst dann, wenn die gewünschte Anzahl  $p$  erreicht ist.

### b) Ausnahme

Es sind alle Endpivots im Feld von gleichem Vorzeichen oder das Feld ist leer. Siehe dazu Abschnitt 11 und die Arbeit [18].

Die Sondierung kann entfallen, wenn für einige oder alle Eigenwerte brauchbare Näherungen vorliegen. Es sei  $x_1$  eine solche Näherung, dann erfolgt der Start mit den beiden Werten

$$x_1; \quad x_2 = x_1 + \varepsilon; \quad \varepsilon = 10^{-\sigma}, \quad (6.2)$$

wo  $\sigma \geq 6$  gewählt werden sollte. Die gewöhnliche Regula falsi liefert die Näherung  $\hat{x}$  (5.7), die jetzt mit  $x_1$  bezeichnet wird, während die beiden Werte (6.2)  $x_2$  und  $x_3$  heißen. Es folgt die nächste Näherung mit  $p = 3$  Punkten usw., bis eine vorgegebene Genauigkeit erreicht worden ist. Dann erfolgt eine Einschließung. Die Frage ist, wann liegt dieser Idealfall vor?

### a) Das Paar $\mathbf{A}; \mathbf{B}$ ist diagonaldominant. Geeignete Startwerte sind

$$x_j = \frac{a_{jj}}{b_{jj}}; \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (6.3)$$

Ein Beispiel dazu findet sich in [21, S. 70] und im Abschnitt 15.

- b) Abgeänderte (benachbarte, gestörte) Matrizenpaare. Der Eigenwert  $\lambda_v$  eines Paares  $\mathbf{A}; \mathbf{B}$  sei (angenähert oder exakt) bekannt. Werden einige oder alle Elemente des Paares geringfügig abgeändert (gestört), so ist  $\lambda_v$  ein geeigneter Startwert zur Berechnung des abgeänderten (gestörten) Eigenwertes  $\tilde{\lambda}_v$ .
- c) Dies gilt insbesondere für die vom Computer ausgedruckten Eigenwerte käuflicher Programme (MATLAB u. a.). Man faßt diese Werte als Näherungen auf (was sie auch sind) und verbessert sie mittels (6.2) und ff.
- d) Nach dem Verfahren von FALK und LANGEMEYER (bzw. JACOBI für  $\mathbf{B} = \mathbf{I}_n$ ) werden so viele Teiltransformationen (Rotationen) durchgeführt, bis alle Außen-elemente in  $\tilde{\mathbf{A}}$  und  $\tilde{\mathbf{B}}$  kleiner als eine vorgegebene Niveauhöhe sind. Die Quotienten

$$x_j = \frac{\tilde{a}_{jj}}{\tilde{b}_{jj}}; \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (6.4)$$

sind dann geeignete Startwerte für die nachfolgende Iteration. Auf diese Weise wird das so außerordentlich aufwendige Rotationsverfahren konkurrenzfähig zu den Algorithmen QR und QZ.

- e) Die ECP - Begleitmatrix  $\mathbf{A}$  zum Partner  $\mathbf{I}$  nach [24, S. 412].

## 7. Mehrfache und engbenachbarte Eigenwerte (Eigenwerthaufen)

Zunächst eine Vorbetrachtung. Zwei oder mehr Eigenwerte heißen einander gleich, wenn sie in einer vorgegeben Anzahl der ersten Dezimalen (auf dem Taschenrechner 10, im Computer 16) übereinstimmen. Da die nachfolgenden Dezimalen unbekannt bleiben, kann nicht entschieden werden, ob Gleichheit vorliegt oder nicht; dieser Begriff ist somit eine Fiktion. Nur in wenigen Anwendungen und vor allem bei konstruierten Testmatrizen treten exakt mehrfache Eigenwerte auf.

Man hat daher grundsätzlich von der Situation der Abb. 3 auszugehen. Innerhalb des Nestes schwanken die Werte der Funktion  $s_{kk}(\lambda)$  zwischen Null und unendlich; um allen numerischen Schwierigkeiten aus dem Weg zu gehen, wird eine Iteration von links und eine zweite von rechts durchgeführt, womit dann auch eine simultane Einschließung der  $m$  Eigenwerte des Nestes gegeben ist.

## 8. Ein- und Ausschließung von Eigenwerten

Nach jeder Verbesserung liegen zwei Werte vor, nämlich der Wert  $x_1$  zum betragskleinsten Wert  $y_1$  und die Verbesserung  $\hat{x}$  nach (5.7). Auf diesen beiden Werten beruht die Einschließung, und hier sind zwei Fälle zu unterscheiden.

Fall A. Es ist  $x_1 < \hat{x}$  (Iteration von links nach rechts).  $x_1$  erzeugt die Kennziffer  $\mu$  und  $\hat{x}$  die Kennziffer  $\mu + m$ . Dann gilt die Einschließung

$$x_1 < \lambda_\mu \leq \lambda_{\mu+1} \leq \dots \leq \lambda_{\mu+m} < \hat{x}. \quad (8.1)$$

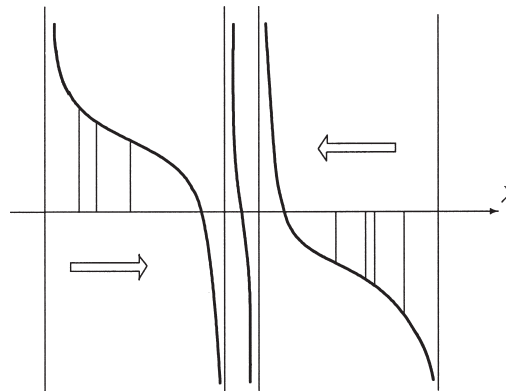


Abbildung 3: Eng benachbarte Eigenwerte. Getrennte Iteration von beiden Seiten

Fall B. Es ist  $x_1 > \hat{x}$  (Iteration von rechts nach links).  $\hat{x}$  erzeugt die Kennziffer  $\mu$  und  $x_1$  die Kennziffer  $\mu + m$ . Dann gilt die Einschließung

$$\hat{x} < \lambda_\mu \leq \lambda_{\mu+1} \leq \dots \leq \lambda_{\mu+m} < x_1. \quad (8.2)$$

Im Fall  $m = 1$  ist die Aussage eindeutig. Für  $m > 1$  dagegen kann nicht entschieden werden, ob es sich um ein Nest von  $m$  Eigenwerten handelt (in welchem sich auch exakt mehrfache Eigenwerte verbergen können) oder um einen Eigenwert der exakten Vielfachheit  $m$ .

Es sei nun  $m = 0$ , dann liegt die Situation der Abb. 4 vor; zwischen  $x_1$  und  $\hat{x}$  liegt somit kein Eigenwert. Um dennoch zu einer Einschließung zu kommen, wird die Formel (5.7) verallgemeinert zu

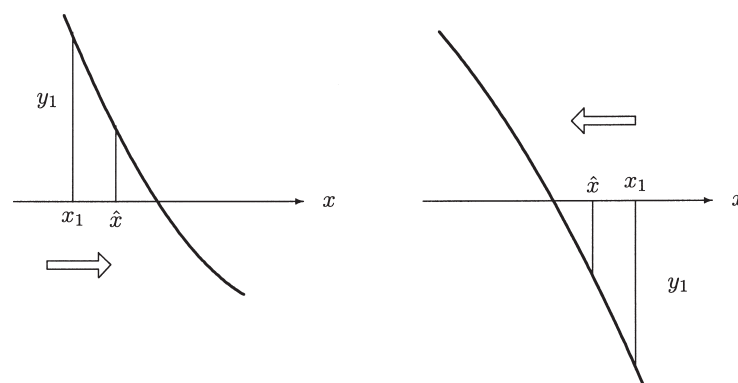


Abbildung 4: Einseitige Iteration ohne Möglichkeit der Einschließung

$$\hat{x} = x_1 - \frac{y_1}{w_p} \beta \quad (8.3)$$

mit einem ganzzahligen Faktor  $\beta$ , der so zu wählen ist, daß  $\mu \neq 0$  wird. Man beginnt mit  $\beta = 2$ ; sollte dies nicht ausreichen, so folgt ein Versuch mit  $\beta = 3$  usw.

Bei der **Ausschließung** von Eigenwerten geht es darum, zwei Schiftpunkte  $\Lambda$  und  $\widehat{\Lambda}$  zu finden, die beide die gleiche Kennziffer  $\mu$  erzeugen. Dies verlangt eine besondere Strategie bei der im Abschnitt 6 beschriebenen Sondierung, siehe dazu die Arbeit [18]. Die Ausschließung von Eigenwerten gewinnt eine besondere Bedeutung bei der Resonanz von erzwungenen Schwingungen, siehe dazu Abschnitt 13.

### 9. Berechnung der Eigenvektoren. Der Optimalvektor

Es sei  $\Lambda$  eine Näherung für den einfachen Eigenwert  $\lambda_\nu$ , so daß  $\mathbf{F}_{jj}(\Lambda)$  regulär ist. Dann wird mit dem Näherungsvektor

$$\mathbf{z}_\nu = \begin{bmatrix} -\mathbf{z}_{jk} \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{F}_{jj}^{-1}(\Lambda) \mathbf{f}_{jk}(\Lambda) \\ 1 \end{bmatrix} \quad (9.1)$$

und der partitionierten Matrix (2.1)

$$\mathbf{F}(\Lambda) \mathbf{z}_\nu = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{jj}(\Lambda) & \mathbf{f}_{jk}(\Lambda) \\ \mathbf{f}_{jk}^*(\Lambda) & f_{kk}(\Lambda) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\mathbf{F}_{jj}^{-1}(\Lambda) \mathbf{f}_{jk}(\Lambda) \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ s_{kk}(\Lambda) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ p_{kk}(\Lambda) \end{bmatrix}. \quad (9.2)$$

Wir sehen: je besser die Näherung  $\Lambda$ , desto betragskleiner das Endpivot. Die  $n - 1$  Nullen außerhalb von  $p_{kk}(\Lambda)$  sind jedoch für jeden Wert von  $\Lambda$  garantiert, weshalb der Vektor  $\mathbf{z}_\nu$  (9.1) als **Optimalvektor** bezeichnet wird.

Es sei jetzt  $\lambda_\nu$  ein Eigenwert der Vielfachheit  $\nu_\nu$  und  $\Lambda$  eine Näherung, für welche der Hauptminor  $\mathbf{F}_{jj}(\Lambda)$  der Ordnung  $n - \nu_\nu$  regulär ist. Dann wird mit einer geeigneten Partitionierung allgemeiner als in (9.2)

$$\mathbf{F}(\Lambda) \mathbf{Z}_\nu = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{jj}(\Lambda) & \mathbf{F}_{jk}(\Lambda) \\ \mathbf{F}_{jj}^*(\Lambda) & \mathbf{F}_{kk}(\Lambda) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\mathbf{F}_{jj}^{-1}(\Lambda) \mathbf{F}_{jk}(\Lambda) \\ \mathbf{I} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{S}_{kk}(\Lambda) \end{bmatrix}, \quad (9.3)$$

wo das nun nicht mehr skalare SCHUR-Komplement  $S_{kk}(\Lambda)$  für  $\Lambda = \lambda_\nu$  gleich der  $\nu_\nu$ -reihigen Nullmatrix wird. Mit der Einheitsmatrix der Ordnung  $\nu_\nu$  hat man damit  $\nu_\nu$  linear unabhängige Eigenvektoren

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{1\nu} & \mathbf{x}_{2\nu} & \dots & \mathbf{x}_{\nu\nu} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\mathbf{F}_{jj}^{-1}(\lambda_\nu) \mathbf{F}_{jk}(\lambda_\nu) \\ \mathbf{I}_{\nu_\nu} \end{bmatrix}. \quad (9.4)$$

Zur Berechnung der Eigenvektoren dient nicht etwa die Zerlegung von CHOLESKY, sondern das Verfahren von GAUSS-JORDAN in zwei Schritten auf folgende Weise.

Die letzte Zeile der nach (2.1) partitionierten Matrix  $\mathbf{F}(\Lambda)$  wird gestrichen, dann verbleibt die Rechteckmatrix

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{jj}(\Lambda) & \mathbf{f}_{jk}(\Lambda) \end{bmatrix}. \quad (9.5)$$

Erster Schritt. Der Gaußsche Algorithmus führt auf

$$\tilde{\mathbf{T}} = \begin{bmatrix} \nabla_{jj} & \tilde{\mathbf{f}}_{jk}(\Lambda) \end{bmatrix}. \quad (9.6)$$

Zweiter Schritt. Verfahren von Jordan.

Die letzte Zeile der Matrix  $\tilde{\mathbf{T}}$  wird durch das Element  $\tilde{f}_{n-1, n-1}$  dividiert (am Platz n-1, n-1 steht dann eine Eins) und die Spalte gleicher Nummer nach oben reduziert; es entsteht dann ein Einheitsvektor. Im nächsten Schritt wird die Zeile der Nummer n-2 durch das Element  $\tilde{f}_{n-2, n-2}$  dividiert usw. Nach insgesamt n-1 Schritten ist schließlich die Matrix  $\hat{\mathbf{T}}$  (9.6) übergegangen in

$$\hat{\mathbf{T}} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{n-1} & \hat{\mathbf{f}}_{jk} \end{bmatrix}. \quad (9.7)$$

mit dem Vektor

$$\hat{\mathbf{f}}_{jk} = \mathbf{z}_{jk} \quad (9.8)$$

aus (9.1).

Für eine allgemeinere Partitionierung mit  $k \neq n$  wird in der Matrix  $\mathbf{F}(\Lambda)$  die Zeile der Nummer k gestrichen; im Vektor  $\mathbf{z}_v$  wird dann  $z_k = 1$ .

## 10. Optimalvektor und RAYLEIGH-Quotient

Der mit einem beliebigen Vektor  $\mathbf{z}$  gebildete RAYLEIGH-Quotient (Formenquotient) ist definiert als

$$R(\mathbf{z}) = \frac{\mathbf{z}^* \mathbf{A} \mathbf{z}}{\mathbf{z}^* \mathbf{B} \mathbf{z}} = \Lambda + \frac{\mathbf{z}^* \mathbf{F}(\Lambda) \mathbf{z}}{\mathbf{z}^* \mathbf{B} \mathbf{z}}. \quad (10.1)$$

Speziell für den Optimalvektor  $\mathbf{z}_v$  wird daraus

$$R_v = \Lambda + \frac{p_{kk}(\Lambda)}{\mathbf{z}_v^* \mathbf{B} \mathbf{z}_v}, \quad (10.2)$$

und es kann gezeigt werden, daß die Tangente am Schur-Komplement die  $\lambda$ -Achse im Punkt  $R_v$  schneidet.

Damit ist das bekannte NEWTON-sche Näherungsverfahren festgelegt durch eine Folge von RAYLEIGH-Quotienten, die gegen den nächstgelegenen Eigenwert  $\lambda_v$  konvergiert, sofern die Differenz  $\Lambda - \lambda_v$  nicht zu groß ist.

In der klassischen Regula falsi wird nun die **Tangente** des NEWTON-Verfahrens ersetzt durch die in Abb. 5 gestrichelt eingezeichnete **Sekante**, und diese liefert einen Schnittpunkt  $\tilde{\Lambda}$ , der näher am Eigenwert  $\lambda_v$  liegt als  $R_v$ , und dies gilt erst recht für die verallgemeinerte Regula falsi mit  $p > 2$  Punkten.

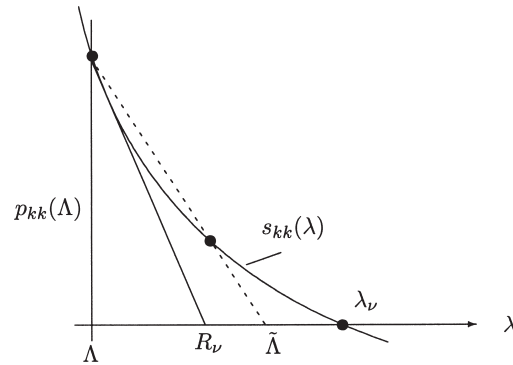


Abbildung 5: Tangente und Sekante am SCHUR-Komplement

Dazu ein einfaches Demonstrationsbeispiel. Das Paar

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}; \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \quad (10.3)$$

besitzt die Eigenwerte

$$\lambda_1 = -0,236\,067\,977, \quad \lambda_2 = 4,236\,067\,977 \quad (10.4)$$

dazu die Eigenvektoren

$$\mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix} 0,618033989 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x}_2 = \begin{bmatrix} -1,618033989 \\ 1 \end{bmatrix}; \quad \mathbf{x}_1^T \mathbf{B} \mathbf{x}_2 = 0. \quad (10.5)$$

Der Näherungswert  $\Lambda = 3$  soll verbessert werden. Aus der Matrix

$$\mathbf{F}(3) = \mathbf{A} - 3\mathbf{B} = \begin{bmatrix} -2 & -4 \\ -4 & -6 \end{bmatrix}, \quad (10.6)$$

folgt  $p_{11} = -2$ , Endpivot  $p_{22} = 2$ , dazu Optimalvektor und quadratische Form

$$\mathbf{z}_\nu = \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{z}_\nu^T \mathbf{B} \mathbf{z}_\nu = 2 \quad (10.7)$$

und somit nach (10.2) der RAYLEIGH-Quotient

$$R_\nu = 3 + \frac{2}{2} = 4. \quad (10.8)$$

Die Regula falsi mit den Startwerten  $\Lambda_1 = 3$  und  $\Lambda_2 = 3,001$  nach (6.2) mit  $\sigma = 3$  liefert die Endpivots 2 und 1,9980005 und damit anstelle von (10.8) den etwas besseren Näherungswert

$$\tilde{\Lambda} = 4,000249922, \quad (10.9)$$

wie es nach Abb. 5 sein muß.

Eine ganz andere Methode besteht in der inversen Iteration nach WIELANDT. Hier werden aus der Folge

$$\mathbf{F}(\Lambda) \mathbf{z}_{\beta+1} = \mathbf{B} \mathbf{z}_{\beta}; \quad \beta = 0, 1, 2, \dots \quad (10.10)$$

Näherungsvektoren für den aktuellen RAYLEIGH-Quotienten erzeugt; doch ist die Konvergenz unbefriedigend, einerlei, ob mit stationärem oder progressivem Schift gearbeitet wird. Eine grundsätzliche Schwierigkeit liegt überdies im Auffinden eines geeigneten Startvektors  $\mathbf{z}_0$ .

## 11. Eine Variante. Das modifizierte Endpivot

Wir betrachten anstelle des SCHUR-Komplementes (2.6) das dividierte charakteristische Polynom

$$\overset{\circ}{f} = \frac{\det \mathbf{F}(\lambda)}{\det \mathbf{F}_{jj}(\overset{\circ}{\Lambda})}, \quad (11.1)$$

wo  $\overset{\circ}{\Lambda}$  der Startschift zu einer Sequenz ist. Anstelle von (3.3) haben wir dann

$$\overset{\circ}{f}(\Lambda) = \frac{p_{11}(\Lambda)p_{22}(\Lambda) \cdots p_{n-1,n-1}(\Lambda)p_{nn}(\Lambda)}{p_{11}(\overset{\circ}{\Lambda})p_{22}(\overset{\circ}{\Lambda}) \cdots p_{n-1,n-1}(\overset{\circ}{\Lambda})} \quad (11.2)$$

oder mit den Quotienten

$$q_{\mu}(\Lambda) = \frac{p_{\mu\mu}(\Lambda)}{p_{\mu\mu}(\overset{\circ}{\Lambda})}; \quad \mu = 1, 2, \dots, n-1 \quad (11.3)$$

und ihrem Produkt

$$Q(\Lambda) = q_1(\Lambda)q_2(\Lambda) \cdots q_{n-1}(\Lambda) \quad (11.4)$$

das **modifizierte Endpivot**

$$\boxed{\overset{\circ}{p}_{nn}(\Lambda) = Q(\Lambda)p_{nn}(\Lambda)}. \quad (11.5)$$

Für den ersten Schritt ist  $\Lambda = \overset{\circ}{\Lambda}$ , somit  $Q(\Lambda) = 1$ , für die folgenden Schritte jedoch ist  $Q(\Lambda)$  um so weniger von 1 verschieden, je näher die Testpunkte an dem gesuchten Eigenwert liegen. Es empfiehlt sich daher, die Variante erst dann anzuwenden, wenn die Funktionswerte schon recht betragsklein geworden sind.



Der Vorteil dieser Vorgehensweise liegt darin begründet, daß es nun keine Pole mehr gibt, die zur numerischen Instabilität besonders bei extrem dichtgelegenen Eigenwerten führen können.

Ein Nachteil besteht im zusätzlichen Rechenaufwand von  $2n$  Multiplikationen pro Schift zur Berechnung des Produktes  $Q(\Lambda)$  nach (11.4) und in der Tatsache, daß mehrfache Eigenwerte nun auch als solche auftreten, womit die Konvergenz der Regula falsi erheblich verzögert wird.

## 12. Numerische Durchführbarkeit und Rechenaufwand

Pro Schift sind die beiden Operationen durchzuführen:

A Berechnung der Matrix  $\mathbf{F}(\Lambda) = \mathbf{A} - \Lambda \mathbf{B}$ .

B Berechnung des Endpivots.

B 1 Implizit

Berechnung des Vektors  $\mathbf{z}_{jk}(\Lambda)$  nach (9.5) bis (9.8) und daraus

$$p_{kk}(\Lambda) = f_{kk}(\Lambda) - \mathbf{f}_{jk}^*(\Lambda) \mathbf{z}_{jk}(\Lambda). \quad (12.1)$$

B 2 Explizit

Pivotisierung der Matrix  $\mathbf{F}(\Lambda) = \mathbf{A} - \Lambda \mathbf{B}$ .

Bezüglich der Reihenfolge der Pivots unterscheidet man:

B 2  $\alpha$  STANDARD. Die Pivots stehen auf den Plätzen 11, 22, ..., nn.

B 2  $\beta$  VOLLSTÄNDIGE PIVOTSUCHE auf der Hauptdiagonale.

In beiden Fällen ist in jedem der  $n - 1$  Reduktionsschritte eine aus zwei Zeilen bestehende Matrix

$$\mathbf{Z}_j = \begin{bmatrix} a_j & a_{j+1} & \dots & a_n \\ b_j & b_{j+1} & \dots & b_n \end{bmatrix} \quad (12.2)$$

so zu kombinieren, daß in

$$\mathbf{L}_j \mathbf{Z}_j = \begin{bmatrix} \tilde{a}_j & \tilde{a}_{j+1} & \dots & \tilde{a}_n \\ 0 & \tilde{b}_{j+1} & \dots & \tilde{b}_n \end{bmatrix}; \quad \det \mathbf{L}_j = 1 \quad (12.3)$$

$b_j$  in Null und  $a_j$  in einen vorgeschriebenen Wert  $\tilde{a}_j$  überführt wird, zum Beispiel  $\tilde{a}_j = 1$ , sogenannte **Pivotregulierung** nach [23, S. 86]. Sonderfälle sind der Gaußsche Algorithmus mit und ohne unitäre Ergänzung, wobei zwei Fälle zu unterscheiden sind:

$$\text{Fall I.} \quad |a_j| \geq |b_j|; \quad q_j = \frac{b_j}{a_j}, \quad |q_j| \leq 1. \quad (12.4)$$

$$\text{Fall II.} \quad |a_j| \leq |b_j|; \quad Q_j = \frac{a_j}{b_j}, \quad |Q_j| \leq 1. \quad (12.5)$$

B 2 a) Gaußscher Algorithmus.

$$\text{Fall I: } \mathbf{L}_j = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -q_j & 1 \end{bmatrix}; \quad \text{Fall II: } \mathbf{L}_j = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & Q_j \end{bmatrix}. \quad (12.6)$$

B 2 b) Gaußscher Algorithmus mit unitärer Ergänzung.

$$\text{Fall I: } \mathbf{L}_j = \begin{bmatrix} 1 & q_j \\ -q_j & 1 \end{bmatrix} \cdot \frac{1}{w_j}; \quad w_j = +\sqrt{1 + \bar{q}_j q_j} \geq 1. \quad (12.7)$$

$$\text{Fall II: } \mathbf{L}_j = \begin{bmatrix} Q_j & 1 \\ -1 & Q_j \end{bmatrix} \cdot \frac{1}{W_j}; \quad W_j = +\sqrt{1 + \bar{Q}_j Q_j} \geq 1. \quad (12.8)$$

Hier bestehen zwei numerisch gleichwertige Möglichkeiten. Entweder man verwendet zur Transformation die Matrix

$$\text{Fall I: } \mathbf{L}_j = \begin{bmatrix} c_j & s_j \\ -s_j & c_j \end{bmatrix} \quad \text{mit } c_j = \frac{1}{w_j}, \quad s_j = \frac{q_j}{w_j} \quad (12.9)$$

$$\text{Fall II: } \mathbf{L}_j = \begin{bmatrix} S_j & C_j \\ -C_j & S_j \end{bmatrix} \quad \text{mit } C_j = \frac{1}{W_j}, \quad S_j = \frac{Q_j}{W_j}, \quad (12.10)$$

nach GIVENS, oder aber man dividiert die Matrix  $\mathbf{Z}_j$  (12.2) durch  $w_j$  bzw.  $W_j$  und unterläßt dafür die Division in  $\mathbf{L}_j$ .

Kommen wir nun zum Rechenaufwand. Die folgende Tabelle enthält (gerundet) die Anzahl der erforderlichen Operationen (Multiplikationen und Additionen).

	$\mathbf{F}(\Lambda)$ vollbesetzt	$\mathbf{F}(\Lambda)$ bandförmig $b \ll n$	$b = 1, \mathbf{B} = \mathbf{I}_n$
$A$	$n(n+1)/2$	$(2b+1)b$	Null
$B1$ oder $B2$ Gauß	$n^3/3$	$(b^2+1)n$	$2n$
$B1$ oder $B2$ Givens	$4n^3/4$	$4(b^2+1)n$	$8n$

(12.11)

Interessant ist an dieser Stelle ein Vergleich mit dem Algorithmus QR, angewendet auf eine Tridiagonalmatrix  $\mathbf{A}(b=1)$  und  $\mathbf{B} = \mathbf{I}_n$ . Dort wird das Endpivot mit einem Aufwand von  $16n$  Operationen berechnet und zum Shift addiert. Daß ein solches Vorgehen mit der verallgemeinerten Regula falsi nicht konkurrieren kann, wurde bereits in [7, S. 1012] gezeigt.

### 13. Algorithmen mit Ordnungserniedrigung. Eine generelle Kritik

Man unterscheidet zwei Vorgehensweisen.

- a) Ordnungserniedrigung mittels Eigenvektoren nach [24, S. 216]. Eine etwa vorhandene Bandstruktur der Matrix  $\mathbf{F}(\Lambda)$  wird dabei im allgemeinen zerstört.
- b) Für den Sonderfall  $\mathbf{B} = \mathbf{I}_n$  gelingt eine Ordnungserniedrigung durch eine Ähnlichkeitstransformation, wobei die Bandbreite erhalten bleibt, und von dieser Möglichkeit machen unter anderem die Algorithmen LR und QR Gebrauch. Die eigentliche Crux dieser Vorgehensweise besteht nun im folgenden:
  1. Es ist keine Parallelrechnung möglich, siehe jedoch [19, S. 327].
  2. Jeder Eigenwert muß mit größter Genauigkeit berechnet werden, weil andernfalls das nach jeder Ordnungserniedrigung verbleibende Restspektrum grob verfälscht werden kann.
  3. Eine nach der Größe geordnete Ausgabe gemäß (1.4) kann erst dann erfolgen, wenn **alle**  $n$  Eigenwerte vorliegen.

Da, wie im Abschnitt 1 ausgeführt, im allgemeinen nur wenige Eigenwerte und diese mit meist geringer (aber mathematisch gesicherter) Stellenzahl gesucht werden, sind Algorithmen mit Ordnungserniedrigung zu verwerfen, sofern andere Verfahren zur Verfügung stehen, siehe dazu auch die Arbeit [18].

## 14. Lineare Schwingungen

Das Feder-Masse-System der Abb. 6 führt nach dem NEWTONschen Grundgesetz auf die Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$m \ddot{x}(t) + cx(t) = 0 \quad (14.1)$$

Mit den Anfangsbedingungen

$$x(0) = x_0; \quad \dot{x}(0) = \dot{x}_0 \quad (14.2)$$

wird nach leichter Rechnung

$$x(t) = x_0 \cos \omega t + \dot{x}_0 \frac{\sin \omega t}{\omega} \quad (14.3)$$

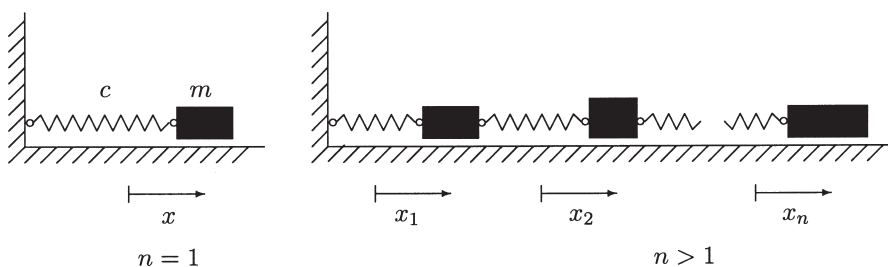


Abbildung 6: Ungedämpftes lineares Schwingungssystem

mit der Kreisfrequenz

$$\omega = \sqrt{\frac{c}{m}} > 0. \quad (14.4)$$

Für ein System mit  $n > 1$  Freiheitsgraden gilt allgemeiner als (14.1) die Vektor-Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$m \mathbf{B} \ddot{\mathbf{x}}(t) + c \mathbf{A} \mathbf{x}(t) = \mathbf{0} \quad (14.5)$$

mit zwei dimensionslosen reellsymmetrischen Matrizen  $\mathbf{A}$  und  $\mathbf{B}$ , wo  $\mathbf{B}$  positiv definit ist, während  $\mathbf{A}$  auch indefinit sein kann, siehe dazu [23, S. 296]. Mit den Anfangsbedingungen

$$\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0; \quad \dot{\mathbf{x}}(0) = \dot{\mathbf{x}}_0 \quad (14.6)$$

lautet die angepaßte vollständige Lösung

$$\mathbf{x}(t) = \sum_{j=1}^n \mathbf{x}_j \left[ \frac{\mathbf{x}_j^T \mathbf{B} \mathbf{x}_0}{\mathbf{x}_j^T \mathbf{B} \mathbf{x}_j} \cdot \cos \omega_j t + \frac{\mathbf{x}_j^T \mathbf{B} \dot{\mathbf{x}}_0}{\mathbf{x}_j^T \mathbf{B} \mathbf{x}_j} \frac{\sin \omega_j t}{\omega_j} \right] \quad (14.7)$$

mit den Eigenkreisfrequenzen (Eigenschwingungszahlen)

$$\omega_j = \sqrt{\lambda_j \cdot \frac{c}{m}}; \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (14.8)$$

zu den Eigenvektoren (Eigenschwingungsformen)  $\mathbf{x}_j$ . Für negative Eigenwerte  $\lambda_j$  gehen die Kreisfunktionen in (14.7) über in Hyperbelfunktionen, siehe dazu [23, S. 292] und [5]. Bei der Verifizierung der Lösung (14.7) beachte man, daß

$$\sum_{j=1}^n \frac{\mathbf{x}_j^T \mathbf{x}_j \mathbf{B}}{\mathbf{x}_j^T \mathbf{B} \mathbf{x}_j} = \mathbf{I}_n \quad (14.9)$$

ist.

## 15. Testmatrizen

Um die Leistungsfähigkeit von Algorithmen zu überprüfen, sind Testmatrizen hoher Ordnung mit ganzzahligen Elementen und bekannten (möglichst ganzzahligen) Eigenwerten unerlässlich. Im folgenden werden daher einige solcher Matrizen zusammengestellt.

### 1. Gruppe, $\mathbf{B} = \mathbf{I}_n$

Grundlage ist die Tridiagonalmatrix

$$\mathbf{A}_0 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (15.1)$$

der Ordnung  $n$  und der Breite  $b_o = 1$  mit den Eigenwerten

$$\lambda_{oj} = 2 \cos \frac{j}{n+1} \pi; \quad j = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (15.2)$$

Wir bilden jetzt die Matrizenfolge

$$\mathbf{A}_0 \rightarrow \mathbf{A}_1 \rightarrow \mathbf{A}_2 \rightarrow \dots \rightarrow \mathbf{A}_\nu \quad (15.3)$$

nach der Vorschrift

$$\mathbf{A}_\nu = \mathbf{A}_{\nu-1}^2 - 2 \mathbf{I}_n; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (15.4)$$

Diese Matrix besitzt die Eigenwerte

$$\lambda_{\nu j} = \lambda_{\nu-1, j}^2 - 2; \quad j = 1, 2, 3, \dots \quad (15.5)$$

und dies läßt sich mittels der leicht zu verifizierenden Identität

$$(2 \cos \beta)^2 - 2 = 2 \cos 2\beta \quad (15.6)$$

auch so schreiben

$$\lambda_{\nu j} = 2 \cos \left( \frac{j}{n+1} 2^\nu \pi \right). \quad (15.7)$$

Man erkennt hieraus die Eingrenzung

$$-2 \leq \lambda_{\nu j} \leq +2, \quad (15.8)$$

ferner gilt

$$\text{Spur } \mathbf{A}_\nu = \sum_{j=1}^m \lambda_{\nu j} = -2. \quad (15.9)$$

Die Matrizen  $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \dots$  sind ebenso wie  $\mathbf{A}_0$  (15.1) doppelsymmetrisch (zentrosymmetrisch). Sie enthalten nur  $2n - 2$  von Null verschiedene Elemente, entweder +1 oder -1. In jeder Zeile (und Spalte) stehen höchstens 2 von Null verschiedene Elemente.

Die Breite der Matrix  $\mathbf{A}_\nu$  ist  $b_\nu = 2^\nu$ , man beachte dazu die Matrix  $\mathbf{A}_1$  der Ordnung  $n = 5$  in (2.11). Für die Matrizen der speziellen Ordnung

$$N = 12k - 1; \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (15.10)$$

gelten besondere Gesetze, die sich aus den Formeln (15.3) bis (15.8) leicht erschließen lassen, und zwar gilt:

$\nu = 1$ . Die Matrix  $\mathbf{A}_1$  besitzt die ganzzahligen Eigenwerte

$$-2, \quad 0, \quad 0, \quad \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (15.11)$$

dazu  $3k - 2$  nichtganzzahlige **Quartette** der Art

$$\begin{bmatrix} -\lambda_\kappa & -\lambda_\kappa \\ \lambda_\kappa & \lambda_\kappa \end{bmatrix}. \quad (15.12)$$

$v = 2$ . Die Matrix  $\mathbf{A}_2$ . Hier sind zwei Fälle zu unterscheiden:

Fall 1:  $k$  ist ungerade. Die Matrix  $\mathbf{A}_2$  der Ordnung  $N$  besitzt die ganzzahligen Eigenwerte

$$-2, \quad -2, \quad 2; \quad \begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (15.13)$$

dazu  $\frac{3}{2}(k-1)$  nichtganzzahlige **Oktette** der Art

$$\begin{bmatrix} -\lambda_\kappa & -\lambda_\kappa & -\lambda_\kappa & -\lambda_\kappa \\ \lambda_\kappa & \lambda_\kappa & \lambda_\kappa & \lambda_\kappa \end{bmatrix} \quad (15.14)$$

Fall 2:  $k$  ist gerade. Die Matrix  $\mathbf{A}_2$  der Ordnung  $N$  besitzt die ganzzahligen Eigenwerte

$$-2, \quad -2, \quad 2; \quad 0, \quad 0, \quad 0, \quad 0; \quad \begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad (15.15)$$

dazu  $\frac{1}{2}(3k - 4)$  nichtganzzahlige Oktette (15.14).

Für die Matrizen  $\mathbf{A}_3, \mathbf{A}_4$  usw. ergeben sich ähnliche Gesetzmäßigkeiten, wie man sich leicht überlegt.

## 2. Gruppe. $\mathbf{B} \neq \mathbf{I}_n$ .

2a. Man gibt zwei reellwertige Diagonalmatrizen

$$\mathbf{D}_A = \text{Diag} \langle a_{11} \ a_{22} \ \dots \ a_{nn} \rangle; \ \mathbf{D}_B = \text{Diag} \langle b_{11} \ b_{22} \ \dots \ b_{nn} \rangle, \ b_{jj} \text{ pos.} \quad (15.16)$$

und eine reguläre reellwertige (komplexwertige) Matrix  $\mathbf{R}$  vor. Das reellsymmetrische (hermitesche) Paar

$$\mathbf{A} = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_A \mathbf{R}; \quad \mathbf{B} = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_B \mathbf{R} \quad (15.17)$$

besitzt dann die Eigenwerte

$$\lambda_j = \frac{a_{jj}}{b_{jj}}; \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (15.18)$$

mit Eigenvektoren  $\mathbf{x}_j$ , die aus den Gleichungen

$$\mathbf{R} \mathbf{x}_j = \mathbf{e}_j; \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (15.19)$$

zu berechnen sind. Es ist vorteilhaft,  $\mathbf{R}$  als obere Dreiecksmatrix  $\nabla$  mit  $n$  Einsen in der Hauptdiagonale zu wählen. Nimmt man nur  $b$  Kodiagonalen mit, so ist  $\mathbf{A}$  ebenso wie  $\mathbf{B}$  bandförmig von der Breite  $b$ .

2b. Das Paar  $\mathbf{A}; \mathbf{B}$  mit  $\det \mathbf{B} = 1$

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & -1 \end{bmatrix}; \begin{bmatrix} n & n-1 & n-2 & \dots & 3 & 2 & 1 \\ n-1 & n-1 & n-2 & \dots & 3 & 2 & 1 \\ n-2 & n-2 & n-2 & \dots & 3 & 2 & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 3 & 3 & 3 & \dots & 3 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 2 & \dots & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

hat mit

$$\sigma_j = 4 \sin^2 \left( \frac{2j}{2n+1} \cdot \frac{\pi}{2} \right); \quad j = 1, 2, 3, \dots, n \quad (15.20)$$

die Eigenwerte

$$\lambda_j = \sigma_j^3 - 4 \cdot \sigma_j^2 + 2\sigma_j; \quad j = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (15.21)$$

Sie sind alle einfach und lassen sich mit

$$\alpha = \frac{4}{27}(14 + 5\sqrt{10}) \approx 4,41650 \quad (15.22)$$

eingrenzen durch

$$-\alpha < \lambda_j < 8; \quad j = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (15.23)$$

Ferner gilt

$$\sum_{j=1}^n \lambda_j = -4. \quad (15.24)$$

Insbesondere wird für die Ordnungszahlen

$$N = 1 + 3k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (15.25)$$

nach (15.20)  $\sigma_j = 1$  und damit nach (15.21)  $\lambda_j = -1$ .

## 16. Numerische Beispiele

Erstes Beispiel.  $\mathbf{A}$  ist die diagonaldominante Tridiagonalmatrix der Ordnung  $n = 1000$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1996 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1998 \end{bmatrix}; \quad \mathbf{B} = \mathbf{I}_n. \quad (16.1)$$

Nach (6.2) bis (6.3) erübrigt sich damit eine Sondierung. Zum Beispiel wird mittels der verallgemeinerten Regula falsi

Schift	Endpivot	
$\Lambda_1 = 6.000000000000000$	$-0.0000809150043060$	(16.2)
$\Lambda_2 = 6.0000010000000001$	$-0.0000826226851644$	
$\Lambda_3 = 5.9999526170221334$	$-0.0000000000005280$	
$\Lambda_4 = 5.9999526170218242$	$0.0000000000000000$	

Schift	Endpivot	
$\Lambda_1 = 1992.0000000000000$	$0.0000809150043060$	(16.3)
$\Lambda_2 = 1992.0000010000000$	$0.0000792073232584$	
$\Lambda_3 = 1992.000047382977$	$0.0000000000005049$	
$\Lambda_4 = 1992.000047382978$	$0.0000000000000000$	

auf 16 Dezimalen genau. Nach Tabelle (12.11) kostet jeder Schritt  $2n = 2000$  flops, somit 8000 flops pro Eigenwert. Dagegen benötigt MATLAB nach dem QR-Algorithmus mehr als den vierzigfachen Aufwand, nämlich durchschnittlich 340 330 flops pro Eigenwert und ermöglicht keine Parallelrechnung.

Zweites Beispiel.  $\mathbf{B} = \mathbf{I}_n$  mit der Matrix  $\mathbf{A}_2$  aus der Folge (15.4). Für die Ordnungszahlen  $n = 12k - 1$  ist nach (15.14)  $\lambda = 1$  ein vierfacher Eigenwert. Dieser Wert wurde mit 7 äquidistanten Schiften eingekreist und dazu Kennziffer und Endpivot berechnet. Die Kennziffer springt um 4, wie es sein muß. Außerdem erkennt man, daß  $\lambda = 1$  ein Wendepunkt der Funktion  $s_{kk}(\lambda)$  ist, denn die Endpivots 1, 2 und 3 stimmen bis auf das Vorzeichen mit den Endpivots 7, 6 und 5 fast überein.

Die Tabelle auf den folgenden Seiten zeigt eine Serie für 6 Ordnungszahlen

Weitere Angaben zu diesem Beispiel finden sich in der Arbeit [18]. Das Programm MATLAB erreicht noch annehmbare Näherungen für  $n = 1199$ ; bei  $n = 11999$  bricht der Algorithmus nach mehrstündiger (!) Rechnung ohne Ergebnis ab.

Drittes Beispiel. Das Paar  $\mathbf{A}; \mathbf{B}$  (15.20) mit  $n = 50$ . Es wurden 820 Schiften benötigt, das sind nach Tabelle (12.11) erste Spalte

$$820 \cdot (50^2 + 50^3 / 3) = 36\,216\,667 \text{ flops.} \quad (16.4)$$

MATLAB benötigt dagegen nur 9 937 020 flops. Dies erlaubt aber keinen Vergleich der beiden Verfahren, da bei dem (vermutlich) benutzten Algorithmus QZ nicht mit dem Originalpaar  $\mathbf{A}; \mathbf{B}$  gestartet wird sondern mit einem transformierten Paar  $\tilde{\mathbf{A}}; \tilde{\mathbf{B}}$ , so daß  $\mathbf{F}(\Lambda) = \tilde{\mathbf{A}} - \Lambda \tilde{\mathbf{B}}$  von schmaler Bandform ist oder zumindest  $\tilde{\mathbf{A}}$  von Hessenbergform und  $\tilde{\mathbf{B}}$  von oberer Dreiecksform.



Schift	Kennziffer	Endpivot	
0.9997000000000000	78	0.0090005308618442	n = 199
0.9998000000000000	78	0.0060002239593183	
0.9999000000000000	78	0.0030000529949531	
1.0000000000000000	78	0.0000000000000000	
1.0001000000000000	82	-0.0029999529950547	
1.0002000000000000	82	-0.0059998239609121	
1.0003000000000000	82	-0.0089996308699059	
Schift	Kennziffer	Endpivot	
0.9997000000000000	798	0.0900855821629596	n = 1199
0.9998000000000000	798	0.0600260103245021	
0.9999000000000000	798	0.0300035002600194	
1.0000000000000000	798	0.0000000000000000	
1.0001000000000000	802	-0.0300025003600704	
1.0002000000000000	802	-0.0600220119267478	
1.0003000000000000	802	-0.0900765902888663	
Schift	Kennziffer	Endpivot	
0.9997000000000000	7998	0.9908608281920325	n = 11999
0.9998000000000000	7998	0.6252298851333586	
0.9999000000000000	7998	0.3030413901863726	
1.0000000000000000	7998	0.0000000000000000	
1.0001000000000000	8002	-0.3030314938606436	
1.0002000000000000	8002	-0.6251917355383734	
1.0003000000000000	8002	-0.9907821157077884	
Schift	Kennziffer	Endpivot	
0.9997000000000000	79994	-3.2990198521444092	n = 119999
0.9998000000000000	79994	0.5786264646354169	
0.9999000000000000	79998	-10.6501345669991119	
1.0000000000000000	79998	0.0000000000000000	
1.0001000000000000	80002	10.6455454944876998	
1.0002000000000000	80006	-0.5789939594482379	
1.0003000000000000	80006	3.2942002399448582	
Schift	Kennziffer	Endpivot	
0.9999700000000000	799994	-3.2968502795449576	n = 1199999
0.9999800000000000	799994	0.5787918192189229	
0.9999900000000000	799998	-10.6480692313227575	
1.0000000000000000	799998	0.0000000000000000	
1.0000100000000000	800002	10.6476103234917183	
1.0000200000000000	800006	-0.5788285687165784	
1.0000300000000000	800006	3.2963683183033789	

Schift	Kennziffer	Endpivot
0.9999970000000000	1599998	2.9455521713982647
0.9999980000000000	1599998	1.4377559998283681
0.9999990000000000	1599998	0.6252109096491022
1.0000000000000000	1599998	0.0000000000000000
1.0000010000000000	1600002	-0.6252107189347079
1.0000020000000000	1600002	-1.4377554341086920
1.0000030000000000	1600002	-2.9455532861773194

$$n = 2399999 \\ (= 12 \cdot 200000 - 1)$$

Natürlich könnte man auch bei dem hier vorgelegten Algorithmus eine Kongruenztransformation

$$\mathbf{R}^* \mathbf{A} \mathbf{R} = \mathbf{T}; \quad \mathbf{R}^* \mathbf{B} \mathbf{R} = \mathbf{I}_n \quad (16.5)$$

vornehmen. Der Rechenaufwand wird dann für das Paar  $\mathbf{T}; \mathbf{I}_n$  nach Tabelle (12.11) letzte Spalte minimal, doch sollte gerade gezeigt werden, daß eine solche Transformation grundsätzlich nicht erforderlich ist.

## 17. Zusammenfassung. Historisches. Ausblick

Das Matrizen-Eigenwertproblem gründet sich auf die beiden homogenen Gleichungssysteme

$$\mathbf{y}^T \mathbf{F} = \mathbf{o}^T, \quad \mathbf{y}^T \neq \mathbf{o}^T; \quad \mathbf{F} \mathbf{x} = \mathbf{o}, \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{o}, \quad (17.1)$$

wo  $\mathbf{F}$  eine quadratische Matrix der Ordnung  $n$  ist.

Nichttriviale Lösungen existieren nur dann, wenn die Determinante der Matrix  $\mathbf{F}$  gleich Null ist, und hier sind drei Gruppen zu unterscheiden:

- A Es ist kein Parameter vorhanden. Man hat somit lediglich den Rang  $r$  von  $\mathbf{F}$  zu bestimmen. Nur wenn  $r < n$  ist, gibt es nichttriviale Lösungen  $\mathbf{y}^T$  und  $\mathbf{x}$  nach [23, S. 107].
- B Das einparametrische Eigenwertproblem, siehe [23, S. 247] und [7].  
Die Nullstellen der skalaren Gleichung

$$\det \mathbf{F}(\lambda) = 0 \quad (17.2)$$

sind die (im allgemeinen unendlich vielen) Eigenwerte der Matrix  $\mathbf{F}(\lambda)$ .

- C Das mehrparametrische Eigenwertproblem nach [24, S. 403]. Hier ist

$$\det \mathbf{F}(\lambda, \delta, \omega \dots) = 0 \quad (17.3)$$

eine skalare Gleichung, welche gewisse Eigenkurven, Eigenflächen usw. definiert.

In mathematischer Hinsicht weitgehend erschlossen ist die Gruppe B, und hier wiederum ist es die Polynommatrix

$$\mathbf{F}(\lambda) = \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_1 \lambda + \mathbf{A}_2 \lambda^2 + \dots + \mathbf{A}_p \lambda^p, \quad (17.4)$$

wo  $\det \mathbf{F}(\lambda)$  ein skalares Polynom der Ordnung  $m \leq \rho \cdot n$  ist. Im einfachsten Fall ist diese Matrix **linear** im Parameter  $\lambda$

$$\mathbf{F}(\lambda) = \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_1 \lambda \quad (17.5)$$

oder anders geschrieben  $\mathbf{F}(\lambda) = \mathbf{A} - \lambda \mathbf{B}$ , womit wir in (1.1) begannen. Hier ist speziell das **hermitesche** Paar (1.2) von derart herausragender Bedeutung, daß Lehr- und Fachbücher existieren, die sich ausschließlich mit dessen Thematik befassen, so etwa [17] und [20].

Soweit die mathematische Theorie. Die Numerik beginnt mit der historischen Arbeit [12] von JACOBI aus dem Jahre 1846, und seitdem wurde eine schier unübersehbare Fülle von Methoden und Methödden entwickelt, siehe dazu die Arbeit [10], wo es mit Recht heißt

**150 Jahre alt und noch immer am Leben: das Eigenwertproblem,**

und man darf annehmen, daß wir im Hinblick auf die Forderungen von Naturwissenschaft und Technik erst am Anfang einer zur Zeit auch nicht annähernd zu erahnenden Entwicklung stehen.

### Literatur

- [1] BUDICH, H. & S. FALK, Die verallgemeinerte Regula falsi und das Matrizen-Eigenwertproblem. ZAMM **81** (2001) SUPP/4, S.1007-1008.
- [2] BUDICH, H. & J. SCHNEIDER, Über ein Jacobi-ähnliches Verfahren für beliebige Matrizenpaare. GAMM-Tagung Metz (1999).
- [3] BUNSE, W. & A. BUNSE-GERSTNER, Numerische lineare Algebra. Teubner, Stuttgart (1985).
- [4] FADDEJEW, D. K. & W.N. FADDEJEW, Numerische Methoden der linearen Algebra. Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin(Ost) (1970).
- [5] FALK, S., Das Matrizeneigenwertproblem der Mechanik. ZAMM **64**, T 243 - T 251 (1994).
- [6] FALK, S., Eine Verallgemeinerung der Regula falsi. ZAMM **75** (1995) Sektion II. S. 629-630.
- [7] FALK, S., Die beschleunigte RITZ-Iteration für einparametrische Matrizen. ZAMM **81** (2001) Sektion 4, S. 1009-1012.
- [8] GANTMACHER, F. R.: Matrizentheorie, Springer-Verlag (1986).
- [9] GOLUB, G. H. & C. F. VAN LOAN, Matrix Computations. North Oxford Academy, Oxford (1983).
- [10] GOLUB, G. H. & H. A. VAN DER VORST, 150 Years old and still alive: eigenproblems. The state of the art in numerical analysis. Oxford, Clarendon Press (1997).
- [11] GOSE, G., Das JACOBI-Verfahren für  $\mathbf{Ax} - \lambda \mathbf{Bx}$ . ZAMM **59** (1979) S. 93-101.

- [12] JACOBI, C. G. J., Über ein leichtes Verfahren, die in der Theorie der Säcularstörungen vorkommenden Gleichungen numerisch aufzulösen. *J. Reine Angew. Math.*, **30**, 51-95 (1846).
- [13] KIELBASINSKI, A & H. SCHWETLICK, Numerische lineare Algebra. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften Berlin 1988.
- [14] KOWALSKY, H.-J.: Lineare Algebra. W. de Gruyter, Berlin (1979).
- [15] MAEß, G., Vorlesungen über Mathematik I, Lineare Algebra, Akademie-Verlag Berlin (1984).
- [16] NIEMEYER, H. & E. WERMUTH, Lineare Algebra, Analytische und numerische Behandlung, Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig, Wiesbaden (1987).
- [17] PARLETT, N. B., The Symmetric Eigenvalue Problem, Prentice Hall Englewood Cliffs, (1980).
- [18] SCHNEIDER, J. & S. FALK, Zur Numerik hermitescher Mammutmatrizen. (In Vorbereitung).
- [19] SCHWARZ, R., Numerische Mathematik, 4. Auflage (1997) B. G. Teubner Stuttgart.
- [20] SCHWARZ, H. R., H. RUTISHAUSER & E. STIEFEL, Numerik symmetrischer Matrizen. Teubner Stuttgart (1968).
- [21] STOER, J. & R. BULIRSCH, Einführung in die Numerische Mathematik II. Springer-Verlag, Berlin etc. (1978) (HTB Band **114**).
- [22] WILKINSON, J. H. & C. REINSCH, Handbook for Automatic Computation, Vol. 2. Linear Algebra. Springer-Verlag, Berlin etc. (1971).
- [23] ZURMÜHL, R. & S. FALK, Matrizen und ihre Anwendungen 1. Grundlagen. 6. Auflage (1992) Springer-Verlag Berlin.
- [24] ZURMÜHL, R. & S. FALK, Matrizen und ihre Anwendungen 2. Numerische Methoden. 5. Auflage (1986).

Für ihre tatkräftige Mitarbeit danke ich Herrn Prof. Dr.-Ing. Jörg Schneider und Herrn stud. math. Frank Simon, beide an der Fachhochschule Wilhelmshaven, sowie Herrn Prof. Dr. Gerhard Zielke, Universität Halle.